



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA – 2019

CONSTRUÇÃO DE UM DISPOSITIVO PARA EXAME ESPECTROFOTOMÉTRICO DE CRISTAIS PIEZOELÉTRICOS E VALIDAÇÃO DE MÉTODOS DFT

Fernanda Rios Beserra; Mirco Ragni

1. Bolsista PIBIC/FAPESB, Graduando em Engenharia Civil, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: nandariosb@gmail.com
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: mirco@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Absorbância. Espectrofotometria. Detector de partículas.

INTRODUÇÃO

O presente estudo representa a tentativa de produção de cristais que atuam como filtros para a luz. A novidade consiste na possibilidade de variar a absorbância específica, para cada frequência do espectro eletromagnético, a partir do carregamento elétrico das superfícies de cristais piezoelétricos que modificam assim a estrutura interna. Alternativamente, no lugar da tensão, a ação mecânica representada pela compressão dos cristais induz uma modificação estrutural da configuração cristalina similar àquela obtida com o campo elétrico. A estas mudanças do retículo cristalino corresponde uma mudança dos orbitais moleculares, e dos níveis de energia associados, que justifica a hipótese de poder variar o coeficiente de extinção molar para uma dada frequência ou faixa de frequências.

A possibilidade de um único sensor ser configurável para absorção e detecção de diferentes tipos de radiação e partículas, simplesmente mudando a tensão aplicada nas superfícies do cristal, é de grande interesse porque elimina a necessidade de sensores múltiplos ou sistemas mecânicos, deixando as operações de medida muito mais flexíveis. Cristais piezoelétricos apropriadamente estruturados poderão ser empregados em sistemas de detecção espectrofotométrica e também lá onde é necessário variar as cores das superfícies como, por exemplo, em lentes de óculos e vidradas. Na espectrofotometria podem substituir os prismas e os retículos de difração com significativa redução do tamanho do sensor como todo. Também na detecção de partículas podem proporcionar avanços significativos especialmente em termos de custo e manutenção.

MATERIAL E METODOLOGIA

A produção de cristais piezoelétricos foi fundamental para este estudo e evitou o custo relacionado com a compra deles. Para a fabricação foram empregados vidraria química, disponível no Laboratório de Exobiologia e Condições Extrema - LECE, e substâncias como o bitartarato de potássio e o carbonato de sódio. O produto obtido é o Tartarato de sódio e potássio tetra hidratado, também conhecido com o nome de “Sal de La Rochelle”. Trata-se de um sal cuja fórmula molecular é $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ que possui as mencionadas características piezoelétricas e foi o objeto de estudo desta pesquisa.

A massa molecular do bitartarato de potássio, fórmula química $\text{C}_4\text{H}_4\text{KO}_6$, é 188,14 g/mol enquanto aquela do bicarbonato de sódio, fórmula química NaHCO_3 , é 84,007 g/mol. Para obter 100 ml de solução 1 molar de bitartarato de potássio ne foram pesados 18,8 g com balança analítica que foram sucessivamente diluídos em água até volume, sob

agitação e aquecendo a 30 °C. Da mesma forma, para obter 100 ml de solução de bicarbonato 1 molar ne foram pesados 8,4 g os quais foram sucessivamente e diluídos até volume. Para esta operação foram usados dois balões volumétricos de 100 ml. Os cristais foram preparados usando 50 ml de solução de bitartarato aquecidos a 82 °C aos quais foi adicionada a solução de bicarbonato em quantidade necessária para neutralizar o pH. Na prática isso é evidenciado pela cessação da efervescência de CO₂ obtida da reação:



A neutralização é marcada também pelo fato da solução se tornar quase transparente. Sucessivamente a mesma é filtrada com papel filtro e transferida em recipiente apropriado. Sendo a solução ainda quente o recipiente foi deixado com a tampa não serrada, permitindo assim a saída do vapor de água, e deixada esfriar por, no mínimo 24 horas. Após este tempo, os cristais de bitartarato de sódio e potássio são encontrados no fundo do recipiente. A operação descrita foi repetida na medida em que os cristais obtidos foram utilizados e foi necessária a reposição. Também foram experimentadas várias técnicas de recristalização.



Figura 1. Produção dos cristais piezoelétricos testados neste trabalho.

Para viabilizar os testes de *stress* mecânicos e elétricos foi projetado um recipiente plástico por meio do programa on-line *Tinkercad* (www.tinkercad.com) que depois foi realizado utilizando a impressora 3D PRUSA I3 do LECE. Após os primeiros testes de funcionalidade o sistema foi modificado para corrigir os problemas com a manuseabilidade e com a calibração das solicitações necessárias para obter respostas significativas dos cristais. Também foi introduzida uma cápsula piezoelétrica comercial para medir a força aplicada ao cristal.

O cristal foi solicitado com *laser* e LEDs de vários comprimentos de onda e também com geradores de tensão contínua até 700 volts. As respostas a tais estímulos foram medidas por meio de osciloscópio digital, multímetro digital e espectrofotômetro UV/Vis da *Ocean Optics*.

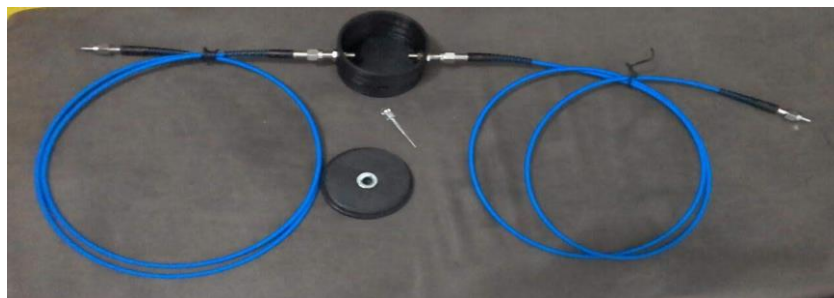


Figura 2. Sistema para análise espectroscópica dos cristais solicitados com estímulos elétricos e mecânicos.

RESULTADOS

Na Figura 1 é mostrada uma das fases de produção dos cristais piezoelétricos usados nos experimentos enquanto na Figura 2 é visível o equipamento, projetado com o *software tinkercad*, com o qual foram analisadas as respostas às solicitações elétricas e mecânicas. A Figura 3 apresenta o cristal já posicionado na cápsula e exposto à radiação eletromagnética coerente (LASER) através de uma fenda. O fragmento visível na foto é obtido cortando com uma lâmina de aço um cristal de dimensões maiores (Ver Figura 4).

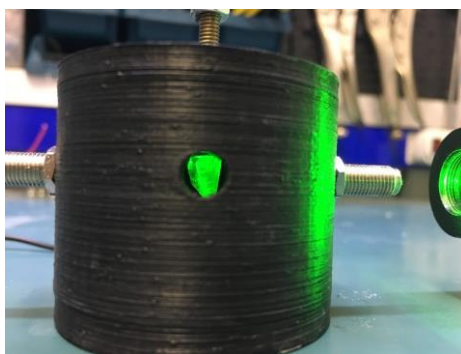


Figura 3. Cristal exposto à radiação eletromagnética de comprimento de onda 532 nm (verde).



Figura 4. Cristais de Tartarato de sódio e potássio tetrahidratado obtidos em laboratório. Produção (foto à esquerda) e conservação (foto à direita).

Alguns resultados dos experimentos efetuados são visíveis na Figura 5.

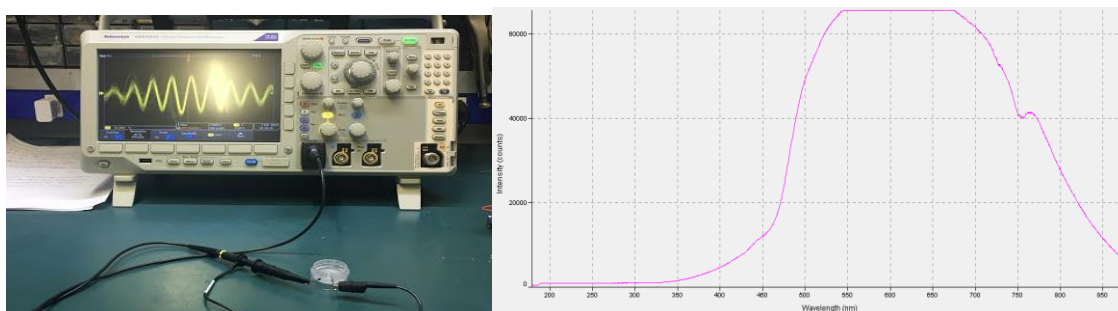


Figura 5. Imagens de resultados experimentais. Resposta do cristal piezoelétrico obtido com o osciloscópio da *Tektronix MDO3012* (foto a esquerda) e espectro de absorvância na faixa UV/Vis obtido com espectrofotômetro da *Ocean Optics* (foto a direita).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Um dos aspectos importantes do trabalho foi a obtenção de cristais de dimensões entre 3 e 4 cm³. Para tal objetivo foi necessário testar várias concentrações das soluções e

também diferentes condições ambientais durante o período de formação dos cristais, as quais influenciaram diretamente no tempo de cristalização que chegou também a 24 horas.

Outro resultado considerável é relacionado com a bagagem de informações conseguida sobre as formas melhores de solicitar os cristais para a determinação das características piezoelétricas e espectroscópicas que levaram à projeção e construção do dispositivo visível nas Figuras 2 e 3. Por meio deste dispositivo é possível comprimir o cristal de forma gradual e com uma força que é possível medir por meio de uma cápsula piezoelétrica comercial inserida no seu interno. A compressão testada foi suficiente para obter como resposta uma tensão nas superfícies dos cristais da ordem dos milivolts, valores típicos para os circuitos eletrônicos nos quais a tecnologia prevista pode ser utilizada.

O acoplamento do dispositivo projetado com o espectrofotômetro UV/Vis permitiu solicitar mecanicamente o cristal ao mesmo tempo em que foi definido o seu espectro. Alternativamente o espectro pode ser medido em função da tensão aplicada ao cristal possibilitando assim a comparação das ações mecânica e elétrica.

Por fim, é interessante observar que o dispositivo criado possui todas as características necessárias para a continuação dos estudos e estender o trabalho para a detecção de partículas subatômicas com energia específica. O esperado é que estímulos mecânicos e elétricos dos cristais possam causar a absorção de partículas com energia bem definida e reagir com descargas elétricas facilmente detectáveis, revelando assim a absorção da partícula.

REFERÊNCIAS

<https://en.wikipedia.org/wiki/Piezoelectricity>. Último acesso: 15/03/2018.

<https://en.wikipedia.org/wiki/Spectrophotometry>. Último acesso: 15/03/2018.

https://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory. Último acesso: 15/03/2018.

https://pt.wikipedia.org/wiki/Tartarato_de_sódio_e_potássio. Último acesso: 03/09/2018.

https://pt.wikipedia.org/wiki/Tartarato_de_poássio. Último acesso: 03/09/2018.

<https://kasvi.com.br/espectrofotometria-analise-concentracao-solucoes/> Último acesso: 07/12/2018.